

Unexplored Analytics of Some Novel 3d-4f Heterometallic Schiff Base Complexes

Partha Pratim Chakrabarty^{a,b}, Sandip Saha^{a,*}, Kamalika Sen^{b,*}, Atish Dipankar Jana^c,
Debarati Dey^d, Dieter Schollmeyer^e, Santiago García-Granda^f,

^a Department of Chemistry, Acharya Prafulla Chandra College, New Barrackpur, Kolkata-700131, India

^b Department of Chemistry, University of Calcutta, 92 APC Road, Kolkata 700009, India

^c Department of Physics, Behala College, Parnasree, Kolkata 700 060, India

^d Department of Chemistry and Environment, Heritage Institute of Technology, Chowbaga Road, Anandapur, Kolkata 700107, India

^e Institut für Organische Chemie, Universität Mainz, Duesbergweg 10-14 55099 Mainz, Germany

^f Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, C/Julián Clavería 8, 33006 Oviedo, Spain

Table S1: Bond Distance and Bond Angle table (Angstrom, Degree)

	Bond Distances		
Pr1 -O2	2.424(7)	Pr1 -O2I	2.633(13)
Pr1 -O1	2.428(7)	Pr1 -O4	2.648(9)
Pr1 -O2W	2.492(19)	Pr1 -O3	2.673(7)
Pr1 -O1W	2.526(13)		
Pr1 -O6I	2.558(9)	Cu1 -N1	1.894(11)
Pr1 -O3I	2.573(12)	Cu1 -O1	1.902(8)
Pr1 -O10I	2.58(3)	Cu1 -N2	1.924(10)
Pr1 -O12 I	2.59(5)	Cu1 -O2	1.926(8)
Pr1 -O7I	2.611(9)		
	Bond Angles		
O2 - Pr1 -O1	63.6(3)	O6I- Pr1- O10I	127.1(7)
O2 -Pr1 -O2W	128.3(5)	O3I -Pr1- O10I	149.1(7)
O1 -Pr1 -O2W	122.2(6)	O2 -Pr1 -O12I	119.9(11)
O2 -Pr1 -O1W	71.9(4)	O1 -Pr1- O12I	126.1(12)
O1 -Pr1 -O1W	69.0(4)	O6I -Pr1- O12I	87.3(11)
O2W -Pr1- O1W	65.9(5)	O3I -Pr1- O12I	126.5(12)
O2- Pr1- O6I	148.9(4)	O3I -Pr1 -O12I	126.5(12)
O1- Pr1- O6I	114.3(3)	O10I- Pr1- O12I	47.3(14)
O2W -Pr1 -O6I	80.6(5)	O2- Pr1- O7I	127.6(3)
O1W- Pr1- O6I	138.4(4)	O1- Pr1 -O7I	160.4(3)
O2- Pr1 -O3I	75.9(4)	O2W -Pr1 -O7I	66.2(5)
O1 -Pr1 -O3I	107.0(4)	O1W -Pr1 -O7I	127.6(5)
O2W- Pr1 -O3I	130.7(6)	O6I -Pr1 -O7I	47.1(3)
O1W -Pr1 -O3I	145.6(4)	O3I -Pr1 -O7I	65.8(4)
O6I -Pr1 -O3I	75.5(4)	O10I -Pr1 -O7I	111.7(7)
O2 -Pr1 -O10I	84.0(7)	O12I -Pr1 -O7I	65.6(12)
O1 -Pr1 -O10I	83.9(7)	O2 -Pr1 -O2I	81.1(4)
O2W- Pr1-O2I	150.6(6)	O1- Pr1 -O2I	67.9(3)
O1W -Pr1- O2I	135.9(4)	O6I- Pr-1 O2I	70.5(4)

O3I- Pr1 -O2I	47.0(4)	O10I -Pr1 -O2I	151.7(7)
O12I -Pr1- O2I	157.7(12)	O2W- Pr1 -O4	76.3(6)
O1W- Pr1 -O4	78.5(4)	O6I -Pr1- O4	69.9(3)
O2W -Pr1 -O3	84.9(6)	O1W- Pr1- O3	81.7(4)
N1 -Cu1- O1	96.0(4)	N1 -Cu1- N2	85.5(5)
O1 -Cu1- N2	174.4(4)	N1 -Cu1 -O2	173.8(5)
O1 -Cu1-O2	83.8(3)	N2- Cu1- O2	94.2(4)
N1 -Cu1- Pr1	137.1(3)	O1 -Cu1- Pr1	41.9(2)
N2 -Cu1 -Pr1	135.6(3)	O2 -Cu1 -Pr1	42.0(2)
N1I- O2I -Pr1	97.5(10)	N1I -O3I -Pr1	97.9(11)

Table S2: Bond Distance and Bond Angle table (Angstrom, Degree)

	Bond Distances		
Nd1 -O1	2.411(6)	Nd1 -O11	2.554(8)
Nd1 -O2	2.420(6)	Nd1 -O12	2.471(9)
Nd1 -O3	2.666(6)	Nd1 -O14	2.533(9)
Nd1 -O4	2.632(7)	Cu1 -O1	1.912(7)
Nd1 -O6	2.511(9)	Cu1 -O2	1.913(6)
Nd1 -O8	2.532(9)	Cu1 -O5	2.346(11)
Nd1 -O9	2.592(8)	Cu1 -N1	1.897(9)
Cu1 -N2	1.913(10)		
	Bond Angles		
O1 -Nd1 -O2	63.0(2)	O4 -Nd1 -O12	84.0(3)
O1 -Nd1 -O3	122.1(2)	O4 -Nd1 -O14	76.6(2)
O1 -Nd1 -O4	60.2(2)	O6 -Nd1 -O8	48.5(3)
O1 -Nd1 -O6	75.6(3)	O6 -Nd1 -O9	67.1(3)
O1 -Nd1 -O8	93.3(3)	O6 -Nd1 -O11	82.6(3)
O1 -Nd1 -O9	118.6(2)	O6 -Nd1 -O12	137.0(3)
O1 -Nd1 -O11	158.2(3)	O6 -Nd1 -O14	153.8(3)
O1 -Nd1 -O12	127.9(3)	O8 -Nd1 -O9	96.2(3)
O1 -Nd1 -O14	83.3(3)	O8 -Nd1 -O11	73.2(3)
O2 -Nd1 -O3	60.5(2)	O8 -Nd1 -O12	138.6(3)
O2 -Nd1 -O4	120.9(2)	O8 -Nd1 -O14	150.0(3)
O2 -Nd1 -O6	101.4(3)	O9 -Nd1 -O11	48.7(3)
O2 -Nd1 -O8	70.0(3)	O9 -Nd1 -O12	69.9(3)
O2 -Nd1 -O9	166.2(3)	O9 -Nd1 -O14	111.6(3)
O2 -Nd1 -O11	124.5(3)	O11 -Nd1 -O12	68.6(3)
O2 -Nd1 -O12	121.0(3)	O11 -Nd1 -O14	117.1(3)
O2 -Nd1 -O14	82.1(3)	O12 -Nd1 -O14	50.4(3)
O3 -Nd1 -O4	153.5(2)	O1 -Cu1 -O2	82.6(3)
O3 -Nd1 -O6	126.9(3)	O1 -Cu1 -O5	97.4(4)
O3 -Nd1 -O8	79.2(3)	O1 -Cu1 -N1	96.3(3)
O3 -Nd1 -O9	119.4(2)	O1 -Cu1 -N2	172.8(4)
O3 -Nd1 -O11	73.1(2)	O2 -Cu1 -O5	95.9(4)
O3 -Nd1 -O12	75.1(3)	O2 -Cu1 -N1	170.8(4)
O3 -Nd1 -O14	77.6(3)	O2 -Cu1 -N2	95.6(3)
O4 -Nd1 -O6	79.6(3)	O5 -Cu1 -N1	93.3(4)
O4 -Nd1 -O8	127.1(3)	O5 -Cu1 -N2	89.7(4)

O4 -Nd1 -O9	66.2(2)	N1 -Cu1 -N2	84.4(4)
O4 -Nd1 -O11	114.3(2)	Nd1 -O1 -Cu1	107.0(3)
Nd1 -O1 -C8	128.3(5)	Cu1 -O5 -C22	126.1(10)
Cu1 -O1 -C8	124.1(6)	Nd1 -O6 -N3	98.6(7)
Nd1 -O2 -Cu1	106.6(3)	Nd1 -O8 -N3	98.3(7)
Nd1 -O2 -C19	129.0(6)	Nd1 -O9 -N4	96.1(6)
Cu1 -O2 -C19	124.5(6)	Nd1 -O11 -N4	98.9(6)
Nd1 -O3 -C18	119.0(5)	Nd1 -O12 -N5	97.8(7)
Nd1 -O3 -C20	124.2(6)	Nd1 -O14 -N5	94.7(7)
C18 -O3 -C20	116.7(7)	Cu1 -N1 -C9	124.1(8)
Nd1 -O4 -C2	124.6(6)	Cu1 -N1 -C11	110.4(8)
Nd1 -O4 -C3	117.3(6)	C9 -N1 -C11	125.2(10)
Cu1 -N2 -C13	124.1(8)	Cu1 -N2 -C12	114.2(8)

Table S3: Bond Distance and Bond Angle table (Angstrom, Degree)

	Bond Distances		
Sm1 -O1	2.653(9)	Sm1 -O11	2.465(18)
Sm1 -O2	2.373(10)	Sm1 -O13	2.515(15)
Sm1 -O3	2.405(10)	Cu1 -O1W	2.427(19)
Sm1 -O4	2.635(10)	Cu1 -O2	1.901(10)
Sm1 -O5	2.459(13)	Cu1 -O3	1.893(11)
Sm1 -O6	2.514(14)	Cu1 -N1	1.930(15)
Sm1 -O8	2.523(13)	Cu1 -N2	1.903(14)
Sm1 -O10	2.566(13)		
	Bond Angles		
O1 -Sm1 -O2	61.0(3)	O4 -Sm1 -O11	84.5(5)
O1 -Sm1 -O3	122.2(3)	O4 -Sm1 -O13	131.0(4)
O1 -Sm1 -O4	155.3(3)	O5 -Sm1 -O6	51.7(4)
O1 -Sm1 -O5	77.3(4)	O5 -Sm1 -O8	82.2(5)
O1 -Sm1 -O6	80.4(4)	O5 -Sm1 -O10	67.3(5)
O1 -Sm1 -O8	120.3(4)	O5 -Sm1 -O11	152.5(6)
O1 -Sm1 -O10	72.2(3)	O5 -Sm1 -O13	133.2(5)
O1 -Sm1 -O11	120.0(5)	O6 -Sm1 -O8	125.4(5)
O1 -Sm1 -O13	73.4(4)	O6 -Sm1 -O10	117.0(5)
O2 -Sm1 -O3	63.4(3)	O6 -Sm1 -O11	145.7(6)
O2 -Sm1 -O4	122.7(3)	O6 -Sm1 -O13	149.6(5)
O2 -Sm1 -O5	120.1(4)	O8 -Sm1 -O10	48.2(4)
O2 -Sm1 -O6	79.0(4)	O8 -Sm1 -O11	70.7(6)
O2 -Sm1 -O8	155.4(4)	O8 -Sm1 -O13	82.1(5)
O2 -Sm1 -O10	127.2(4)	O10 -Sm1 -O11	96.3(6)
O2 -Sm1 -O11	87.4(5)	O10 -Sm1 -O13	69.4(6)
O2 -Sm1 -O13	74.9(5)	O11 -Sm1 -O13	48.5(6)
O3 -Sm1 -O4	60.4(3)	O1W -Cu1 -O2	90.7(6)
O3 -Sm1 -O5	120.2(4)	O1W -Cu1 -O3	94.9(6)
O3 -Sm1 -O6	74.9(4)	O1W -Cu1 -N1	93.0(7)
O3 -Sm1 -O8	116.7(4)	O1W -Cu1 -N2	98.3(7)

O3 -Sm1 -O10	164.0(4)	O2 -Cu1 -O3	82.9(4)
O3 -Sm1 -O11	70.9(5)	O2 -Cu1 -N1	94.5(5)
O3 -Sm1 -O13	106.2(5)	O2 -Cu1 -N2	171.0(6)
O4 -Sm1 -O5	81.1(4)	O3 -Cu1 -N1	171.7(6)
O4 -Sm1 -O6	76.9(4)	O3 -Cu1 -N2	95.8(5)
O4 -Sm1 -O8	67.6(4)	N1 -Cu1 -N2	85.6(6)
O4 -Sm1 -O10	110.1(4)	Sm1 -O1 -C2	122.7(8)
Sm1 -O1 -C3	117.9(8)	Sm1 -O5 -N3	99.9(11)
Sm1 -O2 -Cu1	107.2(4)	Sm1 -O6 -N3	95.7(11)
Sm1 -O2 -C8	128.0(9)	Sm1 -O8 -N4	99.4(11)
Cu1 -O2 -C8	124.5(9)	Sm1 -O10 -N4	97.0(10)
Sm1 -O3 -Cu1	106.2(5)	Sm1 -O11 -N5	100.2(13)
Sm1 -O3 -C28	128.2(9)	Sm1 -O13 -N5	95.7(12)
Cu1 -O3 -C28	125.4(10)	Cu1 -N1 -C9	124.2(13)
Sm1 -O4 -C19	121.6(9)	Cu1 -N1 -C10	112.4(13)
Sm1 -O4 -C27	119.9(9)	C9 -N1 -C10	123.2(17)
Cu1 -N2 -C12	124.1(12)	Cu1 -N2 -C11	108.5(13)